IRAMIS : Institut Rayonnement Matlère de Saclay

Saclay

SPEC/GMT

Simulation de dynamique quantique électronique dans des matériaux bidimensionnels

Spécialité Physique de la matière condensée

Niveau d'étude Bac+5

Formation Master 2

Unité d'accueil SPEC/GMT

Candidature avant le 02/04/2021

Durée 6 mois

Poursuite possible en thèse oui

Contact SMOGUNOV Alexander
0169083032
alexander.smogunov@cea.fr

Résumé

Le but du stage proposé est de développer un code général et efficace pour étudier théoriquement la dynamique électronique dans des systèmes bidimensionnels (2D), mono ou multicouches, comme le graphène ou des matériaux 2D magnétiques découverts récemment.

Sujet détaillé

Le but du stage proposé est de développer un code général et efficace pour étudier théoriquement la dynamique électronique dans des systèmes bidimensionnels (2D), mono ou multicouches, comme le graphène ou des matériaux 2D magnétiques découverts récemment [1]. Il s'agit d'un sujet de très grand intérêt d'un point de vue fondamental, mais également pour des applications technologiques (en spintronique, notamment). Le code s'appuiera sur un modèle réaliste de liaisons fortes à plusieurs orbitales ou les paramètres nécessaires seront extraits des calculs ab initio dans le cadre de la DFT (Théorie de la Fonctionnelle de la Densité). Comme outil principal de DFT nous allons utiliser le package Quantum-Espresso [2] – un des codes de structure électronique les plus précis à base d'ondes planes. Plusieurs approches de transport quantique basées sur la diffusion des fonctions d'ondes ou une méthode directe d'évolution temporelle de paquets d'ondes électroniques vont être implémentées dans le code. Il permettra d'étudier divers phénomènes intéressants tels que des interférences quantiques (dans des structures multicouches, par exemple), ou des effets d'impuretés atomiques et de champ magnétique sur la dynamique des électrons de différents spins (polarisation en spin – l'effet Hall de spin) dans le cadre d'une approche précise basée sur la mécanique quantique.

[1] M. Gibertini, M. Koperski, A. F. Morpurgo, K. S. Novoselov, Magnetic 2D materials and heterostructures, Nature Nanotechnology14, 408 (2019)
[2] P. Giannozzi et al., QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials, Phys.: Condens. Matter 21, 395502 (2009)

Mots clés

transport quantique electronique, spintronique

Compétences

Théorie de la Fonctionnelle de la Densité; Modèle de liaisons fortes

Logiciels

Quantum ESPRESSO; fortran;

Quantum-mechanical simulation of electron dynamics in two-dimensional materials

Summary

The goal of the internship is to develop a general and efficient code for theoretical study of electron dynamics in two-dimensional (2D) systems, single- or multi-layer, such as graphene or recently discovered magnetic 2D materials.

Full description

The goal of the internship is to develop a general and efficient code for theoretical study of electron dynamics in two-dimensional (2D) systems, single- or multi-layer, such as graphene or recently discovered magnetic 2D materials [1] – the subject of great interest from both fundamental point of view but also for possible technological applications (in spintronics, in particular). The code will be based on realistic multi-orbital tight-binding model where needed parameters will be extracted from ab initio DFT (Density Functional Theory) calculations. The main DFT tool to be used is the Quantum-Espresso package [2] – one of the most accurate electronic structure codes based on plane wave expansion of electronic wave functions. Several approaches to quantum transport such as the wave function scattering method or the direct time evolution of electron wave packets will be explored and implemented in the code. Many interesting phenomena such as quantum interference (in multilayer structures, for example) or effect of impurity atoms and magnetic field on spin-dependent electron dynamics (spin separation – spin Hall effect) are going to be addressed based on accurate quantum-mechanical description.

[1] M. Gibertini, M. Koperski, A. F. Morpurgo, K. S. Novoselov, Magnetic 2D materials and heterostructures, Nature Nanotechnology14, 408 (2019)
[2] P. Giannozzi et al., QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials, Phys.: Condens. Matter 21, 395502 (2009)

Keywords

quantum electron stransport, spintronics

Skills

Density Functional Theory; Tight-binding model

Softwares

Quantum ESPRESSO; fortran;